Index

Commentationes et Relationes

Adam, W., Grimison, A., Sprangle, P. A.: Convergence of the Perturbation Theory Expansion for Spin-Spin Coupling Constants . . . 385
Allen, L. C., s. Kollmann, P. A. . . . 399
— s. Sabin, J. R. et al. . . . 235
Anno, T., Sakai, Y.: The Valence Orbital Ionization Potential of the First Transition -Metal Atoms and Ions . . . 208
— Valence Orbital Ionization Potentials of $1s^2\,2s^m\,2p^n$ Atoms and Ions . . . 223
Archibald, T. W., s. Sabin, J. R., et al. . . . 235
Arrighini, G. P., Tomasi, J., Guidotti, C.: SCF and Configuration Interaction Calculations of Some Properties of LiH Molecule in Its Ground State . . . 329
— — Petrongolo, C.: Electric and Magnetic Properties of LiH Molecule According to Hartree-Fock Perturbation Theory . . . 341

Body, R. G.: An Approximate *ab initio* SCF MO Method . . . 107
Bollini, C. G., Giambiagi, J. J., Giambiagi, M., Segre de Giambiagi, M.: On a SC Method for Determining Bond Orders in Alternant Hydrocarbons . . . 394
Boyd, D. B.: Topography of the Electron Density in Pyrophosphate Bonds . . . 184
Brown, R. D., Burden, F. R., Williams, G. R.: Simplified *ab-initio* Calculations for Molecular Systems . . . 98
— Burton, P. G.: Transition-Element Hexafluoride Systems in Ionic Lattices. A SUHF Molecular Orbital Study . . . 309
Bruijn, S. de: π-Electron Correlation in Alternant Hydrocarbons: Bondorder-Bondlength Relation, Force Constants and the Spectroscopic, Vibrational and Thermochemical β-Values . . . 34
Buenker, R. J., s. Shih, S., et al. . . . 277
Burden, F. R., s. Brown, R. D., et al. . . . 98
Burton, P. G., s. Brown, R. D. . . . 309

Carbó, R.: A Modified del Re Method . . . 170
Chakraborty, B., Pan, Y. K.: Franck-Condon Factors for the Transitions N_2, $C^3\pi_u \rightarrow B^3\pi_g$ and CN, $B^2\Sigma^+ \rightarrow X^2\Sigma^+$ . . . 162
Chirkov, A. K., s. Gubanov, V. A., et al. . . . 177
Claverie, P., s. Diner, S., et al. . . . 86

Diner, S., Malrieu, J. P., Jordan, F., Claverie, P.: Use of Perturbation Methods for the Study of Configuration Interaction Effects. IV. Localized SCF Orbitals and Second -Order Energy Correction . . . 86

Eliezer, I.: The Polarized Ion Model and the Bending Force Constants of the Group IIB Halides . . . 77

Frost, A. A.: A Floating Spherical Gaussian Orbital Model of Molecular Structure. VII. Borazane and Diborane . . . 156

Giambiagi, J. J., s. Bollini, C. G., et al. . . . 394
Giambiagi, M., s. Bollini, C. G., et al. . . . 394
Giessner-Prettre, C., Pullman, A.: Configuration Mixing Involving σ and π Orbitals. III. Diexcited Configurations in the CNDO and Modified CNDO Methods . . . 14
Gouterman, M., s. Schaffer, A. M. . . . 1
Gray, N. A. B., Stone, A. J.: Justifiability of the ZDO Approximation in Terms of a Power Series Expansion . . . 389
Grimison, A., s. Adam, W., et al. . . . 385
Gubanov, V. A., Pereliaeva, L. A., Chirkov, A. K., Matevosian, R. O.: Electronic Absorption Spectra and Dipole Moments for Hydrazyl Radicals . . . 177
Guidotti, C., s. Arrighini, G. P., et al. . . . 329

Hammond, H. A.: The Calculation of Excited State and Ground State Properties of Conjugated Heteroatomic Molecules Using a Single SCF-LCAO-CI Method Including σ-Polarization 239
Hancock, R. D., Thornton, D. A.: π-Interaction in Metal β-Ketoenolates 67
Harris, R. E., s. Sabin, J. R., et al. 235
Hartmann, H., s. Strehl, W., et al. 290
Hensen, K., s. Strehl, W., et al. 290
Hoyland, J. R.: An Improved Iterative Extended Hückel Method for Conjugated Molecules 250
Hug, W., Wagnière, G.: Molecular Orbital Calculations of Rotational Strengths: A Study of Skewed Diketones 57

Jordan, F., s. Diner, S., et al. 86

Kollmann, P. A., Allen, L. C.: An SCF Partitioning Scheme for the Hydrogen Bond 399
— s. Sabin, J. R., et al. 235
Kudchadker, S. A., Rao, C. N. R.: Extended Hückel Calculations on n — v Addition Compounds 258

Linnett, J. W., s. Riera, A. 265
Lefebvre, R., Ressayre, E.: Energies des premiers états électroniques du radial NO_3 dans l'approximation Hartree-Fock 391
Lehn, J. M., s. Levy, B., et al. 143
Levy, B., Millie, Ph., Lehn, J. M., Munsch, B.: Orbitales moléculaires S.C.F. localisées. Etude de barrières d'inversion 143
— s. Masson, A., et al. 193

Maigret, B., s. Pullman, B., et al. 44
Malrieu, J. P., s. Diner, S., et al. 86
— s. Masson, A., et al. 193
Matevosian, R. O., s. Gubanov, V. A., et al. 177
Masson, A., Levy, B., Malrieu, J. P.: Formaldéhyde: calcul de l'énergie dans l'état fondamental par une méthode de perturbation 193
Millie, Ph., s. Levy, B., et al. 143
Munsch, B., s. Levy, B., et al. 143

Nakajima, T., s. Yamaguchi, H., et al. 255
Neszmelyi, A., Paoloni, L.: A Semiempirical Method Based on Geminal Functions. II. Transition Moment and One-Electron Density with Geminal Basis Functions . . 166
Nowakowski, J.: Calculation of Spin Densities in Odd Alternant Hydrocarbon Radicals 133

Pan, Y. K., s. Chakraborty, B. 162
Paoloni, L., s. Neszmelyi, A. 166
Perahia, D., s. Pullman, B., et al. 44
Pereliaeva, L. A., s. Gubanov, V. A., et al. 177
Petrongolo, C., s. Arrighini, G. P., et al. 341
Peyerimhoff, S. D., s. Shih, S., et al. 277
Pullman, A., s. Giessner-Prettre, C. 14
Pullman, B., Maigret, B., Perahia, D.: Molecular Orbital Calculations on the Conformation of Polypeptides and Proteins. III. Conformational Maps of Amino-Acid Residues: A Preliminary Comparison of Empirical, Quantum-Mechanical and Experimental Results 44

Rao, C. N. R., s. Kudchadker, S. A. 258
Ressayre, E., s. Lefebvre, R. 391
Riera, A., Linnett, J. W.: Linear Symmetrical H_3: A C I Function Based on STOs Enlarged with Gaussian Functions 265

Sabin, J. R., Harris, R. E., Archibald, T. W., Kollman, P. A., Allen, L. C.: *Ab initio* MO-SCF Calculation on a Model of Anomalous Water 235
Sakai, Y., s. Anno, T. 208
Sarholz, W., s. Strehl, W., et al. 290
Schaffer, A. M., Gouterman, M.: Porphyrins. XXI. Extended Hückel Calculations on Group IV Metal Complexes 1
Segre de Giambiagi, M., s. Bollini, C. G., et al. 394
Shih, S., Buenker, R. J., Peyerimhoff, S. D., Wirsam, B.: Comparison of Cartesian and Lobe Function Gaussian Basis Sets 277
Simpson, W. T.: Developments in the Resonance Theory of the Color of Dyes: Correlation Function Approach 354
Sprangle, P. A., s. Adam, W. et al. 385
Stone, A. J., s. Gray, N. A. B. 389
Strehl, W., Hartmann, H., Hensen, K., Sarholz, W.: Quantenmechanische Behandlung von tief liegenden elektronischen Zuständen des Ammonium-Radikals mit der Methode der Einzentrumentwicklung 290

Terasaka, T., s. Yamaguchi, H., et al. 255
Thornton, D. A., s. Hancock, R. D. 67
Tiňo, J.: Spin Density Calculations in Semiempirical Restricted and Unrestricted SCF MO Methods. I. Spin Densities and Interaction Parameters in Various Quantum Chemical Methods 119
Tomasi, J., s. Arrighini, G. P., et al. 329
— s. Arrighini, G. P., et al. 341
Trindle, C.: Use of Single Determinant Wave Functions Constructed from Localized Orbitals in the Mapping Analysis of Concerted Reactions 261

Veillard, A.: Relaxation during Internal Rotation. Ethane and Hydrogen Peroxyde 21
Veseth, L.: Spin-Orbit and Spin-Other-Orbit Interaction in Diatomic Molecules . . . 368

Yamaguchi, H., Terasaka, T., Nakajima, T.: Electronic Spectra of Hafner's Hydrocarbons 255

Wagnière, G., s. Hug, W. 57
Williams, G. R., s. Brown, R. D., et al. 98
Wirsam, B., s. Shih, S., et al. 277

Recensiones

Dewar, M. J. S.: The Molecular Orbital Theory of Organic Chemistry (Ref. Ynh Kang Pan) 175

Gombás, P., Kisdi, D.: Einführung in die Quantenmechanik und ihre Anwendungen (Ref. E. Schwarz) 174

Moelwyn-Hughes, E. A.: Physikalische Chemie. (Ref. H. v. Hirschhausen) 75
Margenau, H., Kestner, N. R.: Theory of Intermolecular Forces (Ref. M. Simonetta) 76

Indexed in Current Contents

Theoretica Chimica Acta

For speedy publication, this journal is issued at frequent intervals, according to the amount of material received, 4 issues normally constituting one volume. Price per volume: DM 96.—.

It is a fundamental condition that manuscripts submitted should not have been published elsewhere, in this or any other country. The author must undertake not to publish elsewhere at a later date. With the acceptance of a manuscript for publication, the publishers acquire the sole copyright for all languages and countries, including all rights of photocopying or reproduction by any other method.

The use in this journal of registered or trade names, trademarks etc. without special acknowledgement does not imply that such names, as defined, by the relevant protection laws, may be regarded as unprotected and thus free for general use.

Die Zeitschrift erscheint, um eine rasche Publikation zu ermöglichen, in einzelnen Heften, die zu Bänden vereinigt werden. Ein Band besteht im allgemeinen aus 4 Heften. Der Preis eines Bandes beträgt DM 96.—.

Grundsätzlich dürfen nur Arbeiten eingereicht werden, die vorher weder im Inland noch im Ausland veröffentlicht worden sind. Der Autor verpflichtet sich, sie auch nachträglich nicht an anderer Stelle zu publizieren. Mit der Annahme des Manuskriptes und seiner Veröffentlichung durch den Verlag geht das Verlagsrecht für alle Sprachen und Länder einschließlich des Rechts der fotomechanischen Wiedergabe oder einer sonstigen Vervielfältigung an den Verlag über. Jedoch wird gewerblichen Unternehmen für den innerbetrieblichen Gebrauch nach Maßgabe des zwischen dem Börsenverein des Deutschen Buchhandels e. V. und dem Bundesverband der Deutschen Industrie abgeschlossenen Rahmenabkommens die Anfertigung einer fotomechanischen Vervielfältigung gestattet. Wenn für diese Zeitschrift kein Pauschalabkommen mit dem Verlag vereinbart worden ist, ist eine Wertmarke im Betrage von DM 0,30 pro Seite zu verwenden. *Der Verlag läßt diese Beträge den Autorenverbänden zufließen.*

Die Wiedergabe von Gebrauchsnamen, Handelsnamen, Warenbezeichnungen usw. in dieser Zeitschrift berechtigt auch ohne besondere Kennzeichnung nicht zu der Annahme, daß solche Namen im Sinn der Warenzeichen- und Markenschutz-Gesetzgebung als frei zu betrachten wären und daher von jedermann benutzt werden dürften.

Afin d'assurer la publication la plus rapide possible, la revue paraît àde courts intervalles, suivant les articles reçus. En général un volume se compose de 4 fascicules. Le prix de chaque volume est de 96 DM.

L'attention est tout particulièrement attirée sur le fait qu'une fois le manuscrit accepté et publié par les éditeurs, l'unique copyright pour tous pays et toutes langues leur est réservé. Ne doivent être en principe envoyés que des ouvrages qui n'ont jamais été et ne seront jamais publiés ni dans le pays même de l'auteur ni à l'étranger.

En outre, il n'est pas permis sans l'autorisation expresse des éditeurs de faire des reproductions photographiques, des microfilms, des microphotos, etc. . . . , des revues publiées, des communications individuelles ou d'extraits de ces dernières.

La reproduction dans cette revue de marques déposées, marques de fabrique, désignations de marchandises, etc., même sans indication spéciale, n'autorise pas à croire que ces noms définis pas la législation commerciale sur les marques et la propriété industrielle puissent être laissés au libre usage de chacun.

THEORETICA CHIMICA ACTA

Vol. 18

Index

Fasc. 4

Commentationes

RIERA, A., LINNETT, J. W.: Linear Symmetrical H_3: A C I Function Based on STOs Enlarged with Gaussian Functions 265

SHIH, S., BUENKER, R. J., PEYERIMHOFF, S. D., WIRSAM, B.: Comparison of Cartesian and Lobe Function Gaussian Basis Sets 277

STREHL, W., HARTMANN, H., HENSEN, K., SARHOLZ, W.: Quantenmechanische Behandlung von tief liegenden elektronischen Zuständen des Ammonium-Radikals mit der Methode der Einzentrumentwicklung 290

OCE-*Calculations of the Ground State and Some Low Lying Excited States of* NH_4

BROWN, R. D., BURTON, P. G.: Transition-Element Hexafluoride Systems in Ionic Lattices. A SUHF Molecular Orbital Study 309

ARRIGHINI, G. P., TOMASI, J., GUIDOTTI, C.: SCF and Configuration Interaction Calculations of Some Properties of LiH Molecule in Its Ground State 329

ARRIGHINI, G. P., TOMASI, J., PETRONGOLO, C.: Electric and Magnetic Properties of LiH Molecule According to Hartree-Fock Perturbation Theory 341

SIMPSON, W. T.: Developments in the Resonance Theory of the Color of Dyes: Correlation Function Approach 354

VESETH, L.: Spin-Orbit and Spin-Other-Orbit Interaction in Diatomic Molecules . . . 368

Relationes

ADAM, W., GRIMISON, A., SPRANGLE, P. A.: Convergence of the Perturbation Theory Expansion for Spin-Spin Coupling Constants 385

GRAY, N. A. B., STONE, A. J.: Justifiability of the ZDO Approximation in Terms of a Power Series Expansion 389

LEFEBVRE, R., RESSAYRE, E.: Energies des premiers états électroniques du radial NO_3 dans l'approximation Hartree-Fock 391

Energies of Lowest Electronic States of NO_3 *in the Hartree-Fock Approximation*

BOLLINI, C. G., GIAMBIAGI, J. J., GIAMBIAGI, M., SEGRE DE GIAMBIAGI, M.: On a SC Method for Determining Bond Orders in Alternant Hydrocarbons 394

KOLLMANN, P. A., ALLEN, L. C.: An SCF Partitioning Scheme for the Hydrogen Bond 399

Indexed in Current Contents

Responsible for advertisements: Edgar Seidler, D-1000 Berlin 15, Kurfürstendamm 237

Telefon (0311) 883 37 55, Telex: 01-82 811

Springer-Verlag, Berlin · Heidelberg · New York

Druck: Brühlsche Universitätsdruckerei, Gießen

Printed in Germany — © by Springer-Verlag Berlin Heidelberg 1970